

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ
РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ РАН

УСПЕХИ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Сборник тезисов докладов на
II Всероссийской молодежной конференции



ЧЕРНОГОЛОВКА
19–24 мая 2013 года

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ВОДОРОДА НА САМОВОСПЛАМЕНЕНИЕ ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ГОРЮЧИХ

Басевич В.Я., Медведев С.Н., Фролов С.М., Фролов Ф.С.

Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва, Россия

E-mail: medvedevs@chph.ras.ru

В настоящее время ввиду ужесточения требований к эмиссионным показателям транспортных двигателей и стационарных энергетических установок активно обсуждаются идеи перехода от использования классических углеводородных горючих к частичному или полному использованию водорода как горючего.

Цель данной работы – теоретическое исследование влияния добавок водорода на самовоспламенение гомогенных и гетерогенных (капельных) смесей тяжелых углеводородных горючих с воздухом. В качестве углеводородных горючих рассматривали н-гептан и н-декан. В расчетах использовали детальный кинетический механизм (ДКМ) окисления и горения н-декана, содержащий н-гептановый механизм как составную часть.

В работе показано, что добавки водорода влияют не только на суммарную задержку самовоспламенения, но и на продолжительность промежуточных стадий многостадийного процесса самовоспламенения капли. При относительно низких начальных температурах (например, при $T_0 = 800$ К) наблюдается значительное увеличение продолжительности зон холодного и голубого пламени. Это говорит об отборе водородом промежуточных радикалов, участвующих в соответствующих каналах зарождения и разветвления цепей. Тем не менее, как и в гомогенных смесях, при $T_0 < 1050$ К задержка самовоспламенения тройной капельной смеси увеличивается с добавкой водорода, а при $T_0 > 1050$ К – уменьшается.

В работе впервые проведено численное моделирование самовоспламенения и горения гомогенных и гетерогенных (капельных) смесей тяжелых углеводородных горючих (н-гептана и н-декана) с воздухом без добавок и с добавками водорода с применением ДКМ окисления горючего. Показано, что реакционная способность у смесевых водородосодержащих горючих не всегда выше, чем у чистых углеводородных горючих. Этот факт следует иметь в виду при обсуждении перспектив использования смесевых составов с добавлением водорода.